УДК 535.37:537.311.33

Р.М. Пелещак, С.В. Рудницький
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка

ЗМІНА ЗАПОВНЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ВЗДОВЖ ОСІ НАДГРАТКИ GaAs-Si (δ), ЗУМОВЛЕНА НЕУЗГОДЖЕНІСТЮ ПАРАМЕТРІВ

© Пелещак Р.М., Рудницький С.В., 2003

R.M. Peleshak, S.V. Rudnitsky

CHANGE OF ELECTRONIC STATES FILLING ALONG SUPERLATTICE AXES GaAs-Si (δ) CAUSED BY MISMATCH OF A LATTICE PARAMETERS

© Peleshak R.M., Rudnitsky S.V., 2003

Розраховано зміни концентрації електронів у напрямку осі гетероструктури GaAs-Si(δ). Встановлено, що в центрі δ-шару створюється область збіднення і натомість на гетеромежі спостерігається підвищення концентрації електронів. Досліджено залежність зміни концентрації від параметра надгратки.

Change of a charge concentration in heterostructure GaAs-Si (δ) are investigated. It established, that the center of a δ-layer is area of poverty and on heteroborders there is a surplus of concentration of charges. The influence of parameters superlattice on concentration distribution is analyzed.

Вступ. У сучасних умовах для підвищення ефективності роботи НВЧ напівпровідникових пристроїв основними вимогами до їх елементів є висока концентрація носіїв, слабкі внутрішні поля і можливість отримання задовільних характеристик напівпровідникових пристроїв.

Особливий інтерес становлять низьковимірні структури з двовимірним електронним газом, а зокрема гетероструктури, котрі містять дельта(δ)-леговані шари [1]. Саме вони відповідають вищезазначеним вимогам. Вирощування таких структур сприяло отриманню високодосконалих епітаксійних плівок та дослідження їхніх електрофізичних і оптичних властивостей [2]. Цікавими також є дослідження низьковимірних структур з віцінальними межами розділення, що дозволяють отримувати в них δ-шарове латерально-модульоване легування і, отже, впливати на процеси переносу носіїв заряду [3,4].

Сфера застосування δ-легованих структур є широкою. Особливістю таких структур є висока концентрація двовимірних електронів. В основному теоретичний аналіз таких структур проводиться в межах розв'язку системи рівнянь Пуассона та Шредінгера, в якому враховується тільки електростатичний потенціал [1].

Найпопулярнішим матеріалом, який застосовується для створення δ-шарів для експериментальних досліджень, є GaAs, причому для донорних шарів в основному використовують домішку Si, а для акцепторних – Be [1]. Результати оптичних властивостей даних структур не вдається пояснити моделюванням потенціального профілю тільки електростатичним потенціалом [5-7].

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

Модель. У нашій роботі об'єктом дослідження вибрана гетероструктура, в якій матриця GaAs періодично δ-легована кремнієм. Ця структура складається з двох компонент, неузгодженість параметрів ґратки для яких становить ≈ 4 %. Це викликає створення механічної напруженості на границі розподілу GaAs–Si(δ), яка зумовлює деформаційні ефекти, що суттєво впливають на її потенціальний профіль [8].

Для визначення потенціалу в такій структурі необхідно розв'язувати самоузгоджену систему рівнянь, що включає рівняння Пуассона і Шредінгера. У двовимірному випадку це спричиняє труднощі. Тому потенціальну енергію в напрямку, перпендикулярному до нарощуваного шару, ми моделювали періодичним δ-потенціалом, потужність якого визначається через деформаційні параметри. Це дозволяє обмежитися розв'язанням рівняння Шредінгера та граничними умовами, що випливають з неперервності та гладкості хвильових функцій.

Розрахунок перерозподілу електронної густини. Рівняння Шредінгера для носіїв має вигляд [9]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*_e}\nabla_{//}^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*_e}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2\Omega}{m^*_e}\sum_m \delta\left(z - \frac{d}{2}(2m+1)\right)\right]\Psi(x,y,z) = E\,\Psi(x,y,z), \qquad (1)$$

де m^*_e – ефективна маса електрона, $\nabla_{//}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, $\Omega_e = \frac{\Delta V_{c\,mech}\, L_w}{2\alpha_e^*}$ – потужність δ-потенціалу, m – номер δ-шару, $\Delta V_{c\,mech}$ – різниця між деформаційними потенціалами контактуючих компонент GaAs-Si, L_w – товщина δ-шару, d – період надгратки.

Оскільки хвильову функцію можна записати [9]:

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2V}} e^{ik_{//}r_{//}} F_{nk_z}(z) \qquad (2)$$

де V – нормуючий об'єм, F_{nk_z} – блохівська функція n–ї підзони надгратки, то після спрощення (1) для знаходження хвильової функції F_{nk_z} отримаємо

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*_{e(h)}}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2\Omega_{e(h)}}{m^*_{e(h)}}\sum_m \delta\left(z - \frac{d}{2}(2m+1)\right)\right]F_{nk_z}(z) = \varepsilon_{e(h)}F_{nk_z}(z) \qquad (3)$$

де власне значення енергії $\varepsilon_{e(h)} = E - \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*_{e(h)}}$. Для спрощення подальших розрахунків позначимо $-2m^*_{e(h)}\varepsilon_{e(h)}/\hbar^2 = q^2_{e(h)}$.

При врахуванні неперервності та гладкості хвильової функції F_{nk_z}, отримаємо такий вигляд рівняння спектра [9]:

$$ch(q_{e(h)}d) - \frac{\Omega_{e(h)}}{q_{e(h)}} sh(q_{e(h)}d) = 1 \qquad (4)$$

Загальний розв'язок такого рівняння призводить до енергетичного спектра

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 q_n^2}{2m^*} + \Delta(1 - \cos k_z d) \qquad (5)$$

де $2\Delta_n$ – ширина мінізони:

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

$$\Delta_n = \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{2q_n d}{sh(q_n d)[1-\left(\frac{\Omega}{q_n}\right)^2(1-\frac{2}{\Omega d})]} \tag{6}$$

Для розрахунку концентрації носіїв енергетичний спектр виражатимемо, проаналізувавши потенціальний профіль гетероструктури [9]:

$$E_n = E_c^{GaAs} + a_c^{GaAs}\cdot\varepsilon_{mech}^{GaAs} + \varepsilon_{ne} \tag{7}$$

де E_c^{GaAs} – енергетичний рівень дна зони провідності матриці, a_c^{GaAs} – константа деформаційного потенціалу, $\varepsilon_{mech}^{GaAs}$ – параметр деформації.

Хвильова функція для носіїв має вигляд

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{A_{k_z}}{(2V)^{1/2}}e^{ik_{//}r_{//}}e^{ik_z md}\left[e^{q(z-md)} - \frac{e^{ik_z d - qd/2} - e^{qd/2}}{e^{ik_z d + qd/2} - e^{-qd/2}}e^{-q(z-md)}\right], \tag{8}$$

Нормуючи хвильову функцію (8) отримаємо, що $A_{k_z} = \left(\frac{shq_n d}{q_n d} - \frac{1-\cos k_z d ch q_n d}{ch q_n d - \cos k_z d}\right)^{-1/2}$.

Блохівська функція F_{nk_z} має вигляд

$$F_{k_z}(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}A_{k_z}e^{ik_z md}\left[e^{q(z-md)} - \frac{e^{ik_z d - qd/2} - e^{qd/2}}{e^{ik_z d + qd/2} - e^{-qd/2}}e^{-q(z-md)}\right]. \tag{9}$$

З врахуванням періодичності для моделювання розподілу концентрації електронів використаємо формулу [10]:

$$n(z) = 2\sum_{\vec{k}}\left|F_{k_z}(z)\right|^2 n^{(2)}, \tag{10}$$

де $n^{(2)}$ – число носіїв в підзоні, що визначається з рівності рівнів Фермі у всіх заповнених зонах

$$E + \frac{\pi\hbar^2 n^{(2)}}{m^*_e} = E_0 + \frac{\pi\hbar^2 n_0^{(2)}}{m^*_e}, \tag{11}$$

де E_0 – дно зони провідності, зміщене на величину деформаційного потенціалу [9], $n_0^{(2)}$ – поверхнева рівноважна концентрація. Бачимо, що $n^{(2)}$ не залежить від k_z, тому (6) можна записати так:

$$n(z) = 2n^{(2)}\sum_{\vec{k}}\left|F_{k_z}(z)\right|^2. \tag{12}$$

Концентрацію $n_0^{(2)}$ шукатимемо так:

$$n_0^{(2)} = a^{Si}\cdot n_0 = a^{Si}\cdot N_c^{Si}\cdot F_{1/2}(\eta) \tag{13}$$

де a^{Si} – стала ґратки, n_0 – рівноважна концентрація, N_c^{Si} – ефективна густина заповнення станів у зоні провідності, $F_{1/2}(\eta)$ – інтеграл Фермі, $\eta = \frac{F - E_c}{kT}$, F– рівень Фермі.

Результуючий рівень Фермі визначаємо так:

$$F = \frac{E_{c0}^{GaAs} + E_{v0}^{GaAs}}{2} + \frac{1}{2}\cdot kT\cdot\ln\left(\frac{N_v^{GaAs}}{N_c^{GaAs}}\right) - e\varphi_{GaAs}(z) \tag{14}$$

при граничній умові $\lim_{z\to\infty}\varphi_{GaAs}(z) = 0$, де $\varphi_{GaAs}(z)$ – скалярний потенціал електричного поля, що виникає на границі контактуючих напівпровідників.

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

Тоді

$$n^{(2)} = n_0^{(2)} + \frac{m_e^*}{\pi\hbar^2}\cdot\left(E_0 - E\right) \tag{15}$$

Внаслідок еквівалентних перетворень для $\sum_{\vec{k}}\left|F_{k_z}(z)\right|^2$ отримаємо

$$\sum_{\vec{k}}\left|F_{k_z}(z)\right|^2 = \frac{V}{(2\pi)^2}\frac{4\pi^2}{a_x a_y}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}}\left[e^{2qz} + 2\frac{ch(qd)\cos(k_z d)-1}{ch(qd)-\cos(k_z d)} + B\cdot e^{-2qz}\right]\times\frac{A_{k_z}^2}{N_{SL}}dk_z \tag{16}$$

де $a \equiv a_z$, $B = \dfrac{(ch(qd)\cos(k_z d)-1)^2 + \sin(k_z d)sh(qd)}{(ch(qd)-\cos(k_z d))^2}$.

Після спрощень одержимо:

$$\sum_{\vec{k}}\left|F_{k_z}(z)\right|^2 = \frac{a}{2\pi}\left[\frac{2\pi}{a} + (ch2qz - \frac{shqd}{qd})\cdot Int\right] \tag{17}$$

Де позначено $Int = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}}\left(\dfrac{1}{\dfrac{sh(qd)}{qd} + \dfrac{ch(qd)cos(k_z d)-1}{ch(qd)-cos(k_z d)}}\right)dk_z$.

Даний визначений інтеграл знаходиться аналітично і отримуємо такий вираз :

$$Int = \frac{2q}{shqd - qd}\left\{\frac{1-M}{1-N}\left[\frac{\pi d}{a}\right] + \frac{M-N}{1-N}\cdot\frac{1}{\sqrt{N}}\cdot 2\cdot arctg(\frac{tg(\pi d/2a)}{\sqrt{N}})\right\},$$

де $M = th^2\dfrac{qd}{2}$, $N = \dfrac{sh(qd)+qd}{sh(qd)-qd}th^2\dfrac{qd}{2}$.

Отже, ми отримали залежність концентрації

$$n(z) = n^{(2)}\cdot\frac{a}{2\pi}\left[\frac{2\pi}{a} + (ch(2qz) - \frac{sh(qd)}{qd})\cdot Int\right] \tag{18}$$

Перерозподіл концентрації зумовлений напруженою гетеромежею, буде

$$\Delta n(z) = n(z) - n_0 = n^{(2)}\cdot\frac{a}{2\pi}\cdot(ch2qz - \frac{shqd}{qd})\cdot Int \tag{19}$$

Числові розрахунки. Для розрахунків ми використовували такі значення параметрів [9] (табл. 1):

Таблиця 1

Значення параметрів, використаних при розрахунках

Параметри Si	Параметри GaAs
a^{Si} =5.43 Å	a^{GaAS} =5.65 Å
a_c^{Si} = 1.98 eB	a_c^{GaAs} = -7.17 eB
E_c^{Si} =-5.86 eB	E_c^{GaAs} = -5.4 eB
E_v^{Si} =-7.03 eB	E_v^{GaAs} =-6.92 eB
m_e^{*Si}/m_0 =0.26	m_e^{*GaAs}/m_0 =0.07
N_c^{Si} = $2.8\cdot10^{19}$ см$^{-3}$	N_c^{GaAs} = $1.02\cdot10^{19}$ см$^{-3}$
N_v^{Si} = $4.7\cdot10^{17}$ см$^{-3}$	N_v^{GaAs} = $7.0\cdot10^{18}$ см$^{-3}$

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

Розрахунок рівноважної концентрації та енергії Фермі проведений при температурі $T = 300K$. За формулами (13), (14) ми отримали $_0$ 4.08 10^{14} ^{3}, $F = -6.15eB$. Власне значення енергії ε_e та параметр деформації $\varepsilon_{mech}^{GaAs}$ брали таким, що дорівнюють: $\varepsilon_e = -0.005eB$ та $\varepsilon_{mech}^{GaAs} = -0.001$ [9]. Результати розрахунків перерозподілу концентрації показано на графічних залежностях – рис. 1-3.

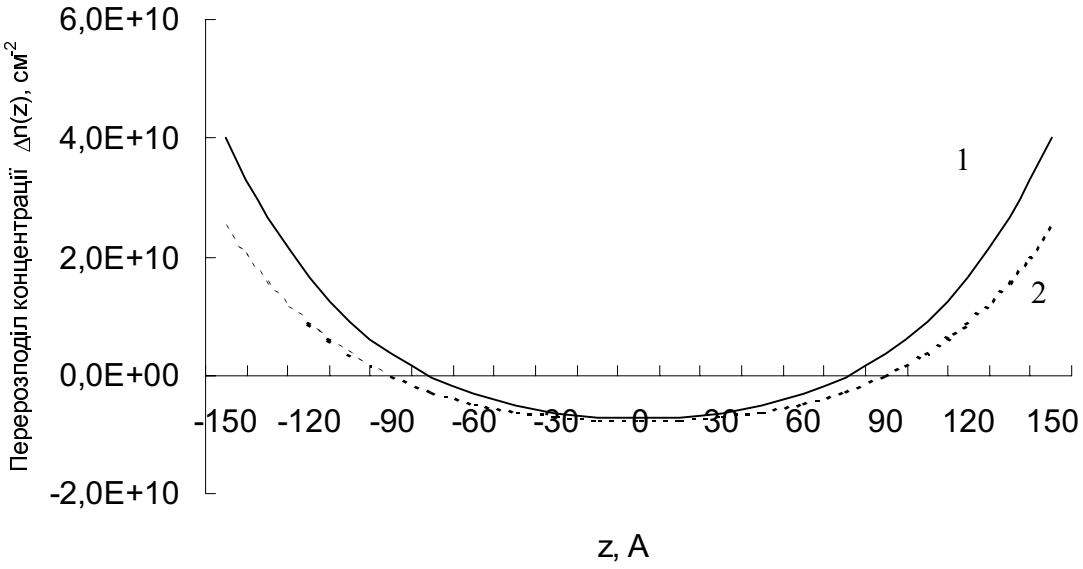

Рис. 1. Перерозподіл концентрації Δn(z) в Si-ямі гетероструктури GaAs-Si(δ) при d=250 Å для L_w=5 Å (1) та для L_w=10 Å (2)

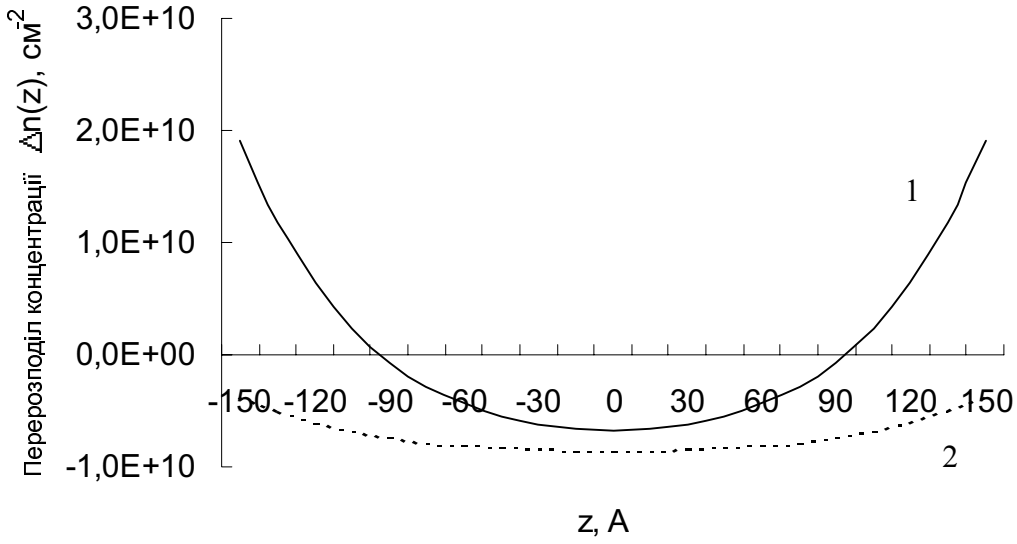

Рис. 2. Перерозподіл концентрації Δn(z) в Si-ямі гетероструктури GaAs-Si(δ) при L_w=5 Å для d=250 Å (1) та для d=300 Å (2).

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

Обговорення результатів Вигляд кривої n(z) згідно з (18) задає множник, що містить $ch(2qz)$.Фізично таку залежність можна пояснити, врахувавши механіко-деформаційні ефекти на межі гетеророзподілу. У приконтактній області матриця GaAs стискується, а Si розширюється [9], що спричинює "зменшення" заряду в Si-ямі.

У нашій задачі вплив деформації на властивості досліджуваної гетероструктури визначає потужність деформаційного δ-потенціалу. Вплив параметрів надгратки на розподіл концентрації зумовлений тим, що потужність деформаційного δ- потенціалу більша при більшому параметрі надгратки [9].

Пункт 5 висновків відображає закон збереження заряду, бо величина Δn(z) характеризує надлишок заряду по відношенню до рівноважної концентрації. Збіднення в центрі δ-шару компенсується надлишком заряду на гетеромежі. З врахуванням періодичності перерозподіл електронної густини матиме вигляд (рис. 3).

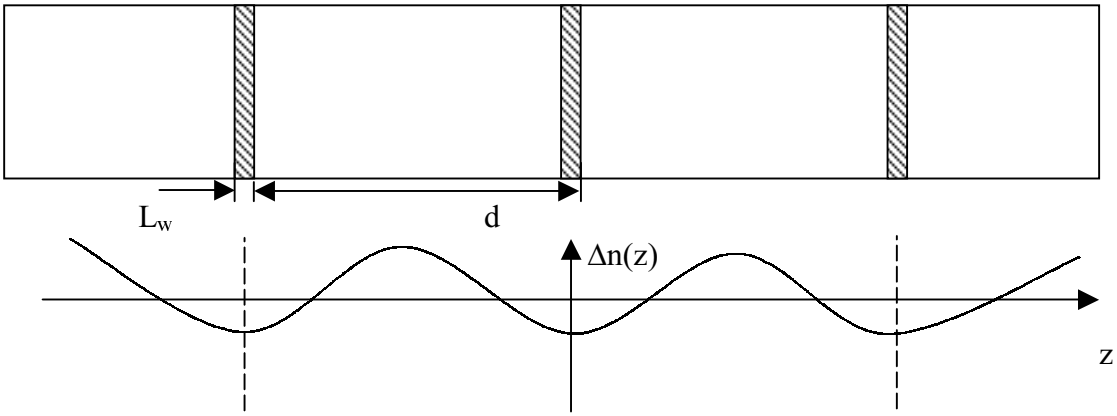

Рис. 3. Перерозподіл електронної густини з врахуванням періодичності надгратки

Висновки. Аналіз розв'язку задачі дає змогу дійти таких висновків:

1. У центрі δ-шару – збіднена область, оскільки концентрація там приймає найменше значення.

2. Глибина модуляції концентрації, тобто різниця між максимальною і мінімальною величиною, має великі величини в структурах з меншим періодом надгратки та меншою товщиною δ-шару.

3. Для матеріалу δ-шару концентрація електронів найбільша на гетеромежі.

4. Концентрація зменшується з зростанням періоду надгратки та товщини δ-шару (рис. 1, 2).

5. З вигляду періодичної залежності Δn(z) якісно можна помітити, що $\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \Delta n(z)dz = 0$.

1. Шик А.Я. Полупроводниковые структуры с δ-слоями. // ФТП. – 1992. – т. 26, № 12. – С. 1161 – 1179.

2. Галиев Г.Б., Мокеров В.Г. Исследования электрофизических и оптических свойств δ-легированных кремнием слоев, выращенных методом МЛЭ на разориентированных в направлении [211] поверхностях (111) GaAs.// ФТП. – 2001. – т. 35, № 4. – С. 421–426.

3. Г.Б. Галиев, В.Г. Мокеров, Э.Р. Ляпин, В.В. Сарайкин, Ю.В. Хабаров // ФТП.– 2001.– Т. 35. – С. 421.

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua

4. В.И. Кадушкин, Е.Л. Шанина. // ФТП. – 1996. – т. 30. – С. 1676.

5. Ю.Ю. Бачеріков, Б.Д. Нечипорук, О.Б. Охріменко // УФЖ.– 1998.– Т.43.– С. 329.

6. В.В. Осипов, А.Ю. Селяков // ФТП. – 1998. – т. 32. – С. 221.

7. В.В. Осипов, А.Ю. Селяков // ФТП. – 1999. – т. 33. – С. 101.

8. Ю.А. Тхорык, Л.С. Хазан. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. – К.: Наукова думка, 1983. –С. 304.

9. Рудницький С.В., Пелещак Р.М. Спектри носіїв δ-легованих кремнієм шарів GaAs (100). // Вісн. Нац. ун-ту "Львівська політехніка". – 2001. – № 430. – С. 77-83.

10. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. – М., 1989. – 240 С.

УДК 537.311.322

Сиротюк С.В.[1)], Кинаш Ю.Є. [1)], Краєвський С.Н. [2)]
[1)] Національний університет "Львівська політехніка",
кафедра напівпровідникової електроніки,
[2)] Український державний лісотехнічний університет

РОЗРАХУНОК МАТРИЦІ ПОТЕНЦІАЛУ СПІН-ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ОСНОВІ ЗМІШАНОГО БАЗИСУ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛАХ

© Сиротюк С.В.[1)], Кинаш Ю.Є. [1)], Краєвський С.Н., [2)] 2003

S.V. Syrotyuk, Yu.E. Kynash, S.N. Kraevsky

THE EVALUATION OF MATRIX OF THE SPIN-ORBITAL INTERACTION POTENTIAL ON MIXED BASIS IN SEMICONDUCTOR CRYSTALS

Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E., Kraevsky S.N., 2003

Виведені розрахункові алгоритми матриці потенціалу спін-орбітальної взаємодії для кристалів зі складними елементарними комірками у змішаному базисі одночастинкових станів, що складається з функцій Блоха атомних серцевин і плоских хвиль. Порівняні методики введення потенціалу спін-орбітальної взаємодії у підходах атомного апріорного псевдопотенціалу та в змішаному базисі. Стверджується послідовніший характер розрахунку потенціалу спін-орбітальної взаємодії у методі змішаного базису, порівняно з псевдопотенціальним наближенням.

The algorithms of the spin-orbital interaction matrix have been derived for crystals with complex structure within the mixed basis of one-particle states, including core Bloch states and plane waves. The comparison of methods of the spin-orbital interaction potential inclusion, derived within *ab initio* atomic pseudopotential approach and with mixed basis has been made. The much consecutiveness of the mixed basis approach in spin-orbital interaction potential evaluation has been stated as compared to pseudopotential approximation.

Вступ. Відомо, що параметр спін-орбітального розщеплення Δ_0 дорівнює 0,006 еВ у алмазі, 0,29 еВ у Ge, 0,48 еВ у Sn, 0,80 еВ у GaSb і 0,93 еВ у ZnTe. Однак навіть у алмазі нехтування ним призведе до злиття p-зон, які формують стелю валентної зони, а отже, і до втрати інформації про стани важких і легких дірок у ній.

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua